

S-f相互作用と磁性

著者	成田 章
号	638
発行年	1979
URL	http://hdl.handle.net/10097/24237

氏名・（本籍）	^{なり} 成 ^た 田 ^{あきら} 章
学位の種類	理 学 博 士
学位記番号	理博第 638 号
学位授与年月日	昭和54年 5 月 23日
学位授与の要件	学位規則第 5 条第 1 項該当
研 究 科 専 攻	東北大学大学院理学研究科 （博士課程）物理学第二専攻
学位論文題目	S - f 相互作用と磁性
論文審査委員	（主査） 教 授 糟 谷 忠 雄 教 授 立 木 昌 助教授 柳 瀬 章

論 文 目 次

第1章	序 論
第2章	モデル
第3章	フェルミ面とMatrix Element
第4章	f-f 交換相互作用 - その1 -
第5章	f-f 交換相互作用 - その2 J (R _z) -
第6章	f-f 交換相互作用 - その3 J (R _⊥) -
第7章	f-f 交換相互作用 - その4 J (R _⊥ , R _z) -
第8章	J (\vec{R}_{nt} , t) のフーリエ変換
第9章	討 論
第10章	結 論
	Appendix
	Figures

論文内容要旨

3次元結晶の中で一次元の単純な結晶周期ポテンシャルを仮定して、それがs-f系に与える効果について論じた。結晶周期ポテンシャルは、具体的には、伝導電子を自由電子とした場合と比較して

- (1) フェルミ面を球から変形させる効果
- (2) 波動関数 (matrix element) の効果

という2つの効果を与える。この2つの効果がある場合、本研究から明らかになったことを以下にまとめる。

I f-f 間接交換相互作用

- (1) f スピンをつなぐベクトルに垂直なフェルミ面の接平面がある場合

- (i) Roth 等が導いた f スピン間の距離が大きい漸近形を matrix element の効果まで入れて拡張した漸近形をつくった。具体的には、f スピン間の距離を R とすると、 R^{-1} の項まで matrix element の効果を正しくとり入れた漸近形をつくった。
- (ii) 漸近形による結果を数値計算と比較し、その適用限界を調べた。その結果、フェルミ面が、ゾーン境界に接近する特別な場合を除いて、第1近接ていどの近距離まで漸近形は使えることがわかった。
- (iii) 振動の周期は、フェルミ面が第1および第2ブリルアンゾーンというように2つのブリルアンゾーンに存在する場合でも、それを拡張ゾーンで見て、相互作用する2つのfスピンのつなぐベクトルに垂直なフェルミ面の接平面の2組の組合せの中で、それらの距離が最大であるものに等しい波数を直径にもつ自由電子モデルでのフェルミ面によるもので、ほぼ決まる。それ以外からの寄与は phase shift という形でとり入れることができる。
- (iv) matrix element は phase shift と f スピン間の距離に依存する enhancement という2つの効果を与える。

- (2) f スピンをつなぐベクトルに垂直なフェルミ面の接平面がない場合

- (i) 相互作用する2つのfスピンの共に格子点上にある場合、matrix element の効果の有無によらずf スピン間の距離が大きい漸近形は exponential damping 型であることがわかった。しかし、その内容は、matrix element により、質的に大きく modify されることを明らかにした。具体的に、matrix element だけを自由電子のときと同じにした constant matrix element では、我々が1つの項からなる単純な形に求めた定符号で exponential damping 型の漸近形がよく合うことがわかった。しかし、matrix element の効果を入れると、その内容は複雑となり、1つの項による単純な形の漸近形では合わし切れず、いく

つかの項が競争しているように見える。そのために、符号を変えることもある。

- (ii) 相互作用する f スピンの 1 つが格子点にあり、もう 1 つが格子点からはずれた位置にあって、かつ、その 2 つの f スピンをつなぐベクトルの方向がフェルミ面の neck をつくるブリルアンゾーン面に垂直なときは、matrix element の効果で大きな違いを生ずる。

matrix element の効果もとり入れたときは、 f スピンがともに格子点上にあるときと同様に、exponential damping 型を示す。しかし、constant matrix element では、自由電子モデルのときよりも、 f スピン間の距離に関する damping がおそく、定符号で、それらの距離の逆 2 乗に比例する damping を示す。従って、 f スピンの 1 つが格子点からはずれた位置にあるときは、matrix element の効果は重要で、その効果を必ずずり入れる必要がある。

さらに、constant matrix element のとき、2 つの f スピンをつなぐベクトルの方向が、フェルミ面の neck をつくるブリルアンゾーン面に垂直な方向から、わずかに傾いて、その面に平行な方向の成分を少し出したとき、そちらの方向に、neck の長さに等しい波数の周期で振動し出す。

II $x(\vec{q})$ および $J(\vec{q})$

$x(\vec{q})$ および $J(\vec{q})$ は $f-f$ 間接交換相互作用のフーリエ変換であり、磁性体のスピン波、スピン構造に関係する。 $x(\vec{q})$ および $J(\vec{q})$ については、相互作用する f スピンが共に格子点にあるときについて調べた。その結論は次のとおりである。

- (i) ベクトル \vec{q} に垂直なフェルミ面の接平面がないとき、maximum の位置など、その分散は matrix element により質的变化を受ける。
- (ii) ベクトル \vec{q} に垂直なフェルミ面の接平面があり、フェルミ面がゾーン境界の近くまで接近している特別の場合を除くと、その分散は Kohn 異常の性格とその出現の強さ (matrix element の大きさによる) に影響される。Kohn 異常の出現の強さはベクトル \vec{q} の長さが極値となるフェルミ面上の 2 点の matrix element の大きさにより、matrix element がそこで大きいとき、Kohn 異常は強く enhance されて現われる。しかし、小さいときは、弱められ matrix element がそこで 0 となっているときは、その異常は消える。
- (iii) フェルミ面がゾーン境界の近くまで接近しているときは、Kohn 異常だけでなく、matrix element もその分散に大きい効果をもち、具体的には、ベクトル \vec{q} に垂直なフェルミ面の接平面がないときと同様、それによっても maximum となる位置が変化することがおこる。

以上、得られた結論をまとめたが、実際の具体的物質との比較は、以上の点をふまえて、今後取りくんで行く必要があり、これからの課題である。

論文審査の結果の要旨

金属磁性体の磁気交換相互作用として $s-f$ あるいは $s-d$ 相互作用は重要な機構であり、特に良く局在した $4f$ 磁性である稀土類磁性体に於ては最も重要なものであることは良く知られたことであるが、従来の取扱いは主に自由電子模型によるもので、結晶の周期場を考慮した取扱いは限られた特種な場合になされたのみで系統的な研究は未だなされていない。成田提出の論文は結晶場の $s-f$ 相互作用に及ぼす効果を系統的詳細に調べたものである。

結晶場の効果は大きく分けてフェルミ面の形の変形及び波動関数の変形を通じての実効的 $s-f$ 交換相互作用常数の強い状態依存性を与えるが、成田はこの二種の効果をそれぞれ分離して議論している。又フェルミ面の変形の効果としては結晶周期場により生じたバンドのエネルギーギャップに垂直及び水平方向の相互作用の異方性に注目し特に垂直方向に於ては、その方向にフェルミ面のある場合とない場合に分け、更に磁性原子の位置としてもポテンシャルの極大、極小、中間に分類してその相違を調べている。

以上の如き系統的、総合的研究により以下の事が明瞭になった。先づ第一に相互作用するスピンの間に垂直なフェルミ面の接平面があるときは相互作用常数の変形を含む場合、含まぬ場合共に距離 R の逆四乗 R^{-4} まで正しい漸近形を求めてその適用範囲を調べフェルミ面が消える極く近傍を除いてかなり近い距離まで、場合によっては最近接位置までその漸近形が使える事を確かめた。そして振動の周期はほぼ自由電子模型のそれと一致し、その振幅、位相が若干変形された形で表現されることを示した。次で相互作用の方向に垂直なフェルミ面の接平面がないときは磁性原子の相対位置により著しい相違の生ずることを見出した。先づ両者の相対位置が周期ポテンシャルと一致するときには、従来考えられてきたエクスポネンシャル減衰の近似が良く成立つ、但し相互作用常数の変形を考慮すると単一でなく数種の減垂項が競合して複雑になることを示した。しかし両者の相対位置がポテンシャルの周期と一致しないときには、相互作用常数の変形も正しく考慮した場合はやはり、エクスポネンシャル減衰で表わされるが、その変形を考えない時は距離の逆二乗に比例する減衰項が現われ、更に原子位置をエネルギーギャップに平行方向に若干、変位させるとネックの波数で振動することを見出した。又、相互作用のフーリエ展開も求め、これから期待されるスピン整列はポテンシャルにより極めて敏感に変化することを示した。

以上成田提出の論文は $s-f$ 相互作用に及ぼす結晶周期ポテンシャルの効果を系統的に詳しく調べて幾多の新しい知見を得ることに成功しこの方面の研究に重要な寄与をなした。よって成田提出の論文は理学博士の学位論文として合格と認める。